现代物理学丛书

输运理论

黄祖洽　丁鄂江著

科学出版社

现代物理学丛书

输运理论

黄祖洽　丁鄂江　著

科学出版社

1987

内 容 简 介

本书重点介绍了各种形式的线性和非线性输运方程和它们的解法，也涉及到输运理论的某些应用.

全书共分七章，第一章为引论；第二、三两章讨论线性输运方程的某些精确解法和数值解法；第四、五两章分别讨论 Boltzmann 方程及 Fokker-Planck 方程；第六章讨论 Brown 运动和输运；第七章讨论应用于等离子体的 Vlasov 方程及 Vlasov-Maxwell 方程组的某些解法和有关的问题. 书后有索引.

本书可供从事非平衡统计力学各方面学习工作的研究生、教师和科研工作者参考.

现代物理学丛书

输 运 理 论

黄祖洽 丁鄂江 著

责任编辑 张邦固

科学出版社 出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1987 年 9 月第一版	开本：850×1168 1/32
1987 年 9 月第一次印刷	印张：17 5/8
印数：精 1—600	插页：精 2
平 1—1,250	字数：463,000

统一书号：13031·3630

本社书号：5410·13—3

定价：布脊精装：6.10 元
平 装：5.00 元

前　言

输运理论是非平衡态统计力学在运动论层次上的数学表述．对于辐射输运、反应堆理论、空气动力学、等离子体动力学及其他输运过程的研究，它都具有重要的意义．

1982 年开始，我在北师大为研究生开设输运理论课，以后又曾短期在国防科技大学为有关专业的教师集中讲授．在师大授课期间，参加听课的除研究生和本校一些教师外，还有北京应用物理与计算数学研究所的部分同志．其中赵玉钧等同志根据我的讲授提纲，整理成了“输运理论”讲义，油印了若干册进行散发．其他单位的人也有闻讯前来索取的． 但这本讲义的叙述仍嫌过于简略，不适于自学．因此，我和本书另一作者丁鄂江同志(他也参加了听课，1984 年春已基本完成其博士论文工作)商量，决定以讲义为原型，由他先加以适当补充和整理编写，再由我修改定稿，写成此书．

本书在详细介绍线性和非线性输运理论的基本内容的同时，也注意介绍我们所注意到的这领域的新近成果．我们希望在阅读本书后读者能掌握必要的理论方法，并能接触到输运理论的前沿．初读时可略去有“*”号的章节． 关于我国学者在输运理论领域的工作，尽我们所知在有关内容中作了简略的介绍，挂一漏万，在所难免．

本书涉及面广，由于我们水平有限，书中肯定有不妥甚至错误之处，敬望读者不吝指正．

黄祖洽

1986 年 1 月 21 日 于北京

目　　录

第一章 引 论

§1.1 引言;非平衡统计力学中三种不同层次的描述

输运理论是研究**输运过程**的数学理论. 输运过程是当大量粒子(或可抽象化为粒子的事物,如街道中的车辆、城市中的居民,如此等等)在空间或某种介质中运动时,由于各粒子位置、动量和其它特征量的变化而引起的各种有关物理量随时空变化的过程. 例如,输运理论可以描述中子在核反应堆中的迁移及其所导致的动力学变化;可以描述光子如何从太阳发射和如何穿过地球大气传播到地面的辐射输运;也可以描述气体分子运动的规律及其所引起的扩散、粘滞性与热传导等输运现象;如此等等. 输运过程在相当广泛的自然现象和日常生活中发生,所以输运理论已成为物理及工程中的重要工具.

输运理论的**基础**是统计力学. 在平衡的系统中,粒子的输运不会引起系统宏观状态的变化,因此输运理论所研究的问题属于**非平衡统计力学**研究的范围.

我们知道,**热力学**只是唯象地讨论宏观基本物理量之间的关系而不涉及系统的微观性质. 也就是说,热力学可以回答许多宏观现象"是什么样?"的问题,但是不从微观规律出发来解释这些现象"为什么是这样?". 因此,尽管热力学是一门应用十分广泛的科学,但它还不能满足对自然现象深入研究的需要. 从组成物质的微观粒子(例如分子)间相互作用的规律来解释这些物质所表现的宏观现象,这正是统计力学的任务.

统计力学的内容可以分成两部分,一部分研究**平衡态**,另一部分研究**非平衡态**. 前者已有相当成熟的理论,其基本假设是系统处于每一可到达微观态的先验几率相等. 从这一假设出发,许多系统的平衡态的热力学规律可以漂亮地从组成系统的微观粒子间

的相互作用导出．另一方面，研究非平衡态的非平衡统计力学的方法却还在不断发展中．除了下面将着重讨论的运动论方法及第六章中将简略提到的**线性响应**理论方法[1,2]外，还有近年来发展起来的**闭路 Green 函数**方法[3,4]以及 Prigogine 等对于开放的非线性非平衡系统提出的**耗散结构**理论方法[5]等．

运动论是从微观动力学出发，通过单粒子分布函数来讨论系统的宏观性质的理论．我们假定微观粒子相互作用的机制已经从实验或理论计算给出(如作用截面或几率)，由此出发建立单粒子分布函数所满足的方程,即运动论方程,然后在此基础上研究有关的物理现象．这样的方法称为运动论方法．运动论方程也称为输运方程．由此可见，运动论不仅包括如何建立输运方程和这方程的基础是否可靠等问题，也包括从输运方程出发对各种物理问题的讨论．

输运理论在承认输运方程的基础上，讨论输运方程的性质和求解的数学方法[6]．因此,输运理论是运动论的一部分，而运动论是非平衡统计力学的一种重要研究方法．

分子运动论是最早发展起来的输运理论．早在 1859 年，J. C. Maxwell 就在前人工作的基础上研究了气体中分子速度的分布．1868 年后的十余年间，L. Boltzmann 发展了分子碰撞理论，建立了可以导出 Maxwell 分子速度分布定律的 Boltzmann 方程．1911 年开始，Chapman 和 Enskog 把 Boltzmann 方程应用于气体中的输运现象．这些工作构成了经典的分子运动论．时至今日，对于研究航天条件下稀薄气体的动力学及聚合物溶液中大分子的取向等现代科学技术中的重要问题，分子运动论仍然是重要的基础[11,7]．天体(特别是太阳)中**辐射输运**的研究也开始得很早[8]，这是因为天体物理学家希望通过对所观测到的天体辐射的分析来推断天体的结构、组成及产生辐射能源的反应．第二次世界大战以后，由于核反应堆和核武器设计的需要，中子输运理论[9]得到了很大的重视并有了飞速发展．此外，在固体热传导和电导方面的声子输运，在气体放电和可控热核反应装置中的等离子体

以及宇宙线簇射中出现的带电粒子输运，也是输运理论研究的重要方面。正是因为输运理论有这许多重要的应用，所以直到今天还吸引着不少物理学家和数学家对它进行各方面的深入研究。

按照所讨论的输运方程对于分布函数是否为线性，输运理论的内容可以分为线性输运理论和非线性输运理论两大部分。线性理论发展得比较成熟，它的方法和结论对于非线性理论也有参考价值，因此本书中首先讨论线性输运理论。非线性理论包括的内容比线性理论丰富得多，而且又是当前十分活跃的理论前沿之一。已有的输运理论教材中对这部分的讨论都比较单薄，本书将试图弥补这一缺陷，用较多的篇幅对非线性输运理论加以讨论（第四章至第七章）。

本章将从非平衡统计力学的一般原理开始讨论。已经说过，运动论是非平衡统计力学中用单粒子分布函数来描述系统状态的一种方式。事实上，有比运动论描述更为详细的方式，即**微观层次的描述**；也有比运动论描述更为简化的方式，即**流体动力学层次的描述**。在具体应用中选择哪一层次的描述，主要取决于所研究现象的类型。研究流动过程，流体动力学层次就足够了；研究中子在某些介质中的迁移或光子与气体的散射，就要用运动论层次的描述；研究超短波长的高频行为，例如非弹性中子散射或激光与等离子体的散射时，就可能要用微观层次的描述了。

§1.2 微观层次的描述

考虑由 N 个粒子所组成的系统。如果这是一个经典系统，那么原则上允许同时确定每个粒子的坐标和动量。所以，三维空间中的 N 粒子系统需要有 $6N$ 个变量来描述，其中 $3N$ 个变量 q_1、q_2、$\cdots$、q_{3N} 描述每个粒子的坐标，另外 $3N$ 个变量 p_1、p_2、$\cdots$、p_{3N} 描述每个粒子的动量。描述系统某一时刻状态的 $6N$ 个变量 $\{q_r, p_r\}$，$(r = 1, 2, \cdots, 3N)$，可以看成某 $6N$ 维空间中某个点的坐标。我们称这个 $6N$ 维空间为（**系统的**）**相空间**，称这个点为系统的代表点，它代表了系统在该时刻的微观态。随着时间的推移，系

统的微观态发生变化，相应地在 $6N$ 维相空间中的代表点发生移动，形成一条轨迹．我们用 Γ_N 表示相空间中的代表点：

$$\Gamma_N = \{q_r, p_r; r = 1,2,\cdots,3N\};$$

假定系统的 Hamilton 量是

$$H = H(\Gamma_N).$$

那么，代表点的轨迹将由运动方程：

$$\begin{cases} \dot{p}_r = -\dfrac{\partial H}{\partial q_r}, \\ \dot{q}_r = \dfrac{\partial H}{\partial p_r}, \end{cases} \quad r = 1,2,\cdots,3N. \tag{1.2.1}$$

来决定．这里圆点表示对时间的微商．

统计力学所讨论的系统是由大量粒子组成的．我们事实上无法弄清一个代表点的轨迹．因此，J. W. Gibbs 提出了**系综**的概念．设想相空间中有一群代表点，它们代表着不同的微观态．引入**系综分布函数** $\rho = \rho(\Gamma_N, t)$，使得当代表点总数为 $\mathscr{N}$ 时，$\mathscr{N}\rho(\Gamma_N, t)d\Gamma_N$ 表示 t 时刻在相空间 Γ_N 点附近体积元 $d\Gamma_N$ 中的代表点数．这里要求 $\mathscr{N}$ 充分大，否则 ρ 就没有意义．此外，$d\Gamma_N$ 既要足够大以保证其中有相当数目的代表点，又要足够小以保证其中代表点的分布大致均匀．这样的体积元称为‘**物理上无穷小**’，而不是严格数学意义上的无穷小．由 $\rho(\Gamma_N,t)$ 的定义马上得出归一化条件：

$$\int d\Gamma_N \rho(\Gamma_N,t) = 1. \tag{1.2.2}$$

代表点在相空间运动时，既不消失，也不新产生．因此 ρ 应当满足相空间中的连续性方程，即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\dot{\Gamma}_N) = 0,$$

其中 div 是系统相空间中的散度算子，其含意如下：

$$\operatorname{div}(\rho\dot{\Gamma}_N) \equiv \sum_{r=1}^{3N}\left\{\frac{\partial}{\partial q_r}(\rho\dot{q}_r) + \frac{\partial}{\partial p_r}(\rho\dot{p}_r)\right\}.$$

所以

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\sum_{r=1}^{3N}\left(\frac{\partial \rho}{\partial q_r}\dot{q}_r+\frac{\partial \rho}{\partial p_r}\dot{p}_r\right)$$
$$+\rho\sum_{r=1}^{3N}\left(\frac{\partial \dot{q}_r}{\partial q_r}+\frac{\partial \dot{p}_r}{\partial p_r}\right)=0. \tag{1.2.3}$$

利用(1.2.1)式可以证明

$$\frac{\partial \dot{q}_r}{\partial q_r}=\frac{\partial^2 H}{\partial q_r\partial p_r}=-\frac{\partial \dot{p}_r}{\partial p_r}.$$

于是,(1.2.3)式左边第三项消失,结果得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\sum_{r=1}^{3N}\left(\frac{\partial \rho}{\partial q_r}\dot{q}_r+\frac{\partial \rho}{\partial p_r}\dot{p}_r\right)=0. \tag{1.2.4}$$

这就是 **Liouville 方程**. 利用(1.2.1)式及 **Poisson 括号**

$$\{H,\ \rho\}\equiv\sum_{r=1}^{3N}\left(\frac{\partial H}{\partial q_r}\frac{\partial \rho}{\partial p_r}-\frac{\partial H}{\partial p_r}\frac{\partial \rho}{\partial q_r}\right),$$

可以把(1.2.4)式改写成

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=\{H,\ \rho\}. \tag{1.2.5}$$

注意到 $\rho=\rho(\Gamma_N,t)$,可以看出(1.2.4)式左边就是跟随代表点运动时所观察到的 ρ 的变化率. 将这个变化率记为 $D\rho/Dt$,于是 Liouville 方程也可以写成

$$\frac{D\rho}{Dt}=0. \tag{1.2.6}$$

该方程说明,跟随代表点运动时所观察到的 ρ 是固定不变的. 换句话说,如果考虑一个包含代表点并随之一起运动的小体积元,那么这小体积元的体积是不随时间变化的. 这就是 Liouville 方程所表示的、相空间体积守恒的性质.

通常所谓给定了系统的初态,并不意味着给定了系统的微观态,而是指给定了系统的宏观态. 这一个宏观态常常对应着许多微观态,它们的代表点在相空间里构成一个子空间或超曲面. 由于我们事实上无法知道系统究竟处于哪一个微观态,因此

Gibbs 假定代表点在那个子空间或超曲面上每一处的几率都相等. 这就是先验几率相等假设. 已经说过，这是平衡态统计力学的基本假设. 但在讨论非平衡态时，只有这一个假设是不够的.

非平衡统计力学讨论系统状态的时间演变，它由 Liouville 方程决定. (1.2.4)式的特征方程是

$$dt = \frac{dp_r}{-\frac{\partial H}{\partial q_r}} = \frac{dq_r}{\frac{\partial H}{\partial p_r}}, \quad r = 1,2,\cdots,3N. \tag{1.2.7}$$

它恰好就是运动方程组 (1.2.1). 所以 Liouville 方程与系统的微观运动方程组是等价的. 但是通过引进系综分布函数 ρ, Liouville 方程已把一群代表点(或一个系综)的时间演变当作整体来讨论.

引入 Liouville 算子 L:

$$L\rho \equiv i\{H,\rho\}, \tag{1.2.8}$$

那么 Liouville 方程又可以写成

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -iL\rho. \tag{1.2.9}$$

可以写出它的形式解:

$$\rho(\Gamma_N,t) = e^{-iLt}\rho(\Gamma_N,0). \tag{1.2.10}$$

我们对一个**动力学变量**(以下简称**物理量**) A 的测量不是瞬时完成的. 测量总要持续一段时间，因此测量的结果实际上是时间平均值:

$$\langle A(t)\rangle_{\text{时间}} = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' A(\Gamma_N(t+t')), \tag{1.2.11}$$

其中 T 是测量持续时间. 系统的微观态变化是很快的，例如气体中分子以很高的速度运动，分子之间十分频繁地发生碰撞，都使系统的微观态发生改变. 但是，系统的宏观态(例如气体的体积、局域温度、局域密度等等)明显变化所需要的时间却比微观态变化所需的时间长得多. (1.2.11)式中所取的时间间隔 T 在微观意义上很长，而在宏观意义上却是极短暂的. 只要 T 的大小属于这一范围，$\langle A(t)\rangle_{\text{时间}}$ 实际上就与 T 无关. 如(1.2.11)式中取时间平均之

后，抹去了系统微观态剧烈变化所造成的物理量的快速涨落，但仍保留了宏观态的较慢变化所对应的物理量随时间的演变。

然而，(1.2.11)式并未真正解决如何计算物理量测量的结果这一问题，因为我们无法计算代表点 Γ_N 的轨道. Gibbs 又假定：一系统状态的时间平均 $\langle A(t)\rangle_{时间}$ 就等于系综平均 $\langle A(t)\rangle$:

$$\langle A(t)\rangle \equiv \int d\Gamma_N \rho(\Gamma_N, t) A(\Gamma_N) = \langle A(t)\rangle_{时间} \qquad (1.2.12)$$

将形式解(1.2.10)代入(1.2.12)式，可以求得

$$\langle A(t)\rangle = \int d\Gamma_N [e^{-iLt}\rho(\Gamma_N, 0)] A(\Gamma_N),$$

利用算子 L 的定义(1.2.8)进行分部积分之后，上式可以化为

$$\langle A(t)\rangle = \int d\Gamma_N \rho(\Gamma_N, 0) A(\Gamma_N, t), \qquad (1.2.12')$$

其中

$$A(\Gamma_N, t) \equiv e^{iLt} A(\Gamma_N). \qquad (1.2.13)$$

显然，$A(\Gamma_N, t)$ 满足的方程是

$$\frac{\partial A}{\partial t} = iLA = \{A, H\}, \qquad (1.2.14)$$

它与 Liouville 方程只差一个符号.

Gibbs 关于时间平均等于系综平均的假定并不是明显成立的，因此，这一假定引起了许多讨论. 本书不拟讨论这一假设成立的根据，而是简单地承认这一假定. 这里只是指出，对于平衡态，物理量的测量值不再随时间改变，因此 T 也可以任意长；与此同时，ρ 也不随时间改变. 这时，(1.2.12)式可以改写成

$$\int d\Gamma_N \rho(\Gamma_N) A(\Gamma_N) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T dt A(\Gamma_N(t)). \qquad (1.2.15)$$

这个式子的右边是时间平均，也就是物理量 A 的测量值；左边是系综平均，也就是按照先验等几率假设计算出的物理量 A 的平均值. 因此(1.2.15)式就是平衡态统计力学中的先验等几率假设. 由此可见，Gibbs 关于系综平均等于时间平均的假设是统计力学的最基本假设. 全部统计力学，不论所研究的是平衡态还是非平衡态，